

Title	カロテノイドデータベース化学フィンガープリントを用いたカロテノイドの生合成パスウェイの再構築
Author(s)	薮崎, 純子
Citation	京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 (2018), 2017: 71-71
Issue Date	2018-03
URL	<a href="http://hdl.handle.net/2433/230771">http://hdl.handle.net/2433/230771</a>
Right	
Type	Article
Textversion	publisher

カロテノイドデータベース化学フィンガープリントを用いたカロテノイドの生合成パスウェイの再構築  
Pathway reconstruction of carotenoid biosynthesis using Carotenoids DB Chemical Fingerprints

藪崎純子

研究成果概要

我々は、独自に開発したカロテノイド DB 化学フィンガープリント (正式には Carotenoids DB Chemical Fingerprint)を用いてカロテノイドの生合成経路の再構築を行なった。我々が構築した Carotenoids Database には 2018 年 2 月現在 1174 の天然のカロテノイドが収録されている。各カロテノイドには、我々の開発した独自のフィンガープリントが定義されている。詳しくは [http://carotenoiddb.jp/Entries/Carotenoid\\_DB\\_Chemical\\_Fingerprint\\_Help.pdf](http://carotenoiddb.jp/Entries/Carotenoid_DB_Chemical_Fingerprint_Help.pdf) を参照。また同データベースには 424 件の酵素・非酵素のカロテノイドの反応データ (<http://carotenoiddb.jp/Reaction/list1.html>)、117 件のカロテノイド生合成パスウェイ (<http://carotenoiddb.jp/Pathway/list1.html>) を収録した。カロテノイドの既知の生化学酵素反応系において、どのようなフィンガープリント変化が起こっているかを調べた結果、類似の酵素反応では同一のフィンガープリント変化が起こっていることが認められた。この結果を踏まえ、現在収録されているカロテノイドの全対全のフィンガープリントをスーパーコンピュータを用いて比較し、フィンガープリントの差集合が既知のフィンガープリント変化と同一のペアを抽出した。それらのペアの中から眼によるキュレーションにより尤もらしい反応ペアを反応予測プログラムの元データの一部とした。それに既知の酵素反応ペアを加えカロテノイドの生合成パスウェイの再構築プログラムを 2 通り実装した。一つは全経路探索をスーパーコンピュータを用いて行なったものである。以下のプログラムで尤度を決めてそのデータをスコアリングした。[http://carotenoiddb.info/search\\_theoretical\\_pathway2.cgi](http://carotenoiddb.info/search_theoretical_pathway2.cgi) を参照。もう一つは全経路探索ではないが高速のものである。[http://carotenoiddb.jp/search\\_possible\\_pathways\\_light.cgi](http://carotenoiddb.jp/search_possible_pathways_light.cgi) を参照。それらのプログラムのデータから、尤もらしいと思われるパスウェイを眼でキュレーションした。結果、2018 年 2 月現在、これまで 570 の生物種における 383 のカロテノイドについて上記の 2 通りのプログラムによりパスウェイ再構築が得られた。以下にその一例プラシノ藻 *Mantoniella squamata* のカロテノイド Anhydrouriolide のパスウェイ再構築結果を示す。

**CA00674 (Anhydrouriolide) biosynthesis pathway**  
Path: CA00043 (Lycopene) → CA00298 (d-Carotene) → CA00587 (α-Carotene) → CA00592 (Zeinoxanthin) → CA00597 (Lutein) → CA00617 (Dihydrolutein) → CA00610 (Micromonol) → CA00625 (Micromonol) → CA00671 (Deepoxyuriolide) → CA00673 (Uriolide) → CA00674 (Anhydrouriolide)  
The basis: CB000010, CB000033, CB000033, CB000033, Proposed reaction, CB000035, CB000045, CB000074, CB000074, CB000074  
Probable necessary gene products: CrtL-e(5.5.1.18), LCY-e(5.5.1.18) → LCY-b, CrtL(5.5.1.19), CrtL-b(5.5.1.19), CrtL-e(5.5.1.19) → LUT5/CYP97A3, CrtR-b → LUT1/CYP97C1 → unknown gene product → unknown gene product → unknown gene product → unknown gene product → unknown gene product → unknown gene product

